



TITLE:

複合多項式について(数値解析と科学計算)

AUTHOR(S):

秦野, 和郎

CITATION:

秦野, 和郎. 複合多項式について(数値解析と科学計算). 数理解析研究所講究録 1991, 746: 76-85

ISSUE DATE:

1991-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/102225>

RIGHT:

複合多項式について

愛知工業大学電子工学科 秦野和郎 (Kazuo Hatano)

1. まえがき

筆者らは, "打ち切り Fourier 級数の誤差の主要項" 項を計算し得ることに着目し, 与えられた実関数を三角多項式と多項式との和で近似する手法を提案して来た. そこでは三角多項式と多項式との和に "複合多項式" なる名称をつけてきたが, いくつかの古い文献を調べてみた所, 別の着想からそのような近似関数が提案されていることがわかった. ある文献では "多項式+三角級数" の形の展開を $f(x)$ の "Lanczos representation", と呼び, 別の文献では $f(x)$ を "区分的多項式+三角級数" の形に展開することを "Krylov's method" などと呼んでいる.

文献 [1], p.122 付近で Lanczos はある多項式を使うと, 与えられた関数 $f(x)$ を十分に滑らかな周期関数に書き換え得ることを示した. このことを参考にして, Jones & Hardy は文献 [2] において多項式と三角多項式との和による補間について議論している. 更に, Lyness は文献 [3] で, この議論を発展させた. Lyness によると, 関数 $f(x)$ は $p-1$ 次の多項式 $h_{p-1}(x)$ と, その Fourier 係数が $O(r^{-p})$ で減少する三角級数 $g_p(x)$ との和に展開される. すなわち $f(x) = h_{p-1}(x) + g_p(x)$ である. この式の右辺を Lyness は $f(x)$ の Lanczos 表現と呼んでいる.

文献 [4], p.79 に述べられているように, これとは独立に, Krylov は複数個の不連続点を持つような関数を, 区分的多項式を使って十分に滑らかな周期関数とする手法を提案している. 原理は Lanczos と同じである. このような優れた着想が 1936 年に出版された書物に出ているにもかかわらず実用的な計算法として使われていないのは, これらの方法が桁落ちの激しい方法だからである.

ここでは, そのような古典的な方法が, なぜ数値的に不安定になるのか, その理由を述べ, 複合多項式で, この不都合がどのように解決されているかを述べる.

2. Fourier 級数の収束を速める Krylov の方法

まず, $f(x)$ の Lanczos representation についてその原理を簡単に紹介する. 与えられた関数 $f(x) : x \in [0, 2\pi]$ は十分に滑らかであるとする. このとき,

$$(2.1) \quad f^{(\nu)}(2\pi) - f^{(\nu)}(0) = P_m^{(\nu)}(2\pi) - P_m^{(\nu)}(0) : 0 \leq \nu \leq m-1$$

を満たす m 次の多項式 $P_m(x)$ を作り, $f(x) - P_m(x)$ を周期 2π で実軸上に周期的に延長して得られる周期関数を $\hat{f}_m(x)$ とする.

$$(2.2) \quad \hat{f}_m(x) = f(x) - P_m(x) : x \in [0, 2\pi]$$

が

$$(2.3) \quad \hat{f}_m(x) \in C^{m-1}(-\infty, \infty)$$

なる性質を持つことは容易にわかる. 従って $\hat{f}_m(x)$ を Fourier 展開すると, その Fourier 係数は $O(1/j^{m+1})$ で急速に零に収束する. $\hat{f}_m(x)$ の Fourier 展開式を $T_\infty(\hat{f}_m; x)$ と書くと, $f(x)$ は

$$(2.4) \quad f(x) = P_m(x) + T_\infty(\hat{f}_m; x)$$

と展開される. 上式の右辺が $f(x)$ の Lanczos 表現である.

Lanczos 表現では $f(x) : x \in [0, 2\pi]$ は十分に滑らかであると仮定している. $f(x)$ がいくつかの不連続点を持っていたとしても上のような手順は構成可能である. Krylov の方法は $f(x)$ が複数個の不連続点を持つときに Lanczos 表現と同じように $f(x)$ を, 区分的多項式と, 急速に収束する三角級数との和に展開する. 歴史的には Krylov の方法 (文献 [4] の原本は 1936 に出版されている) が Lanczos 表現 (文献 [1]) より速く活字の形になっており, また, より一般性がある. Krylov の方法は Lanczos 表現を含むので以下では Krylov の方法を述べる.

周期 2π の周期関数 $f(x)$ は区間 $[0, 2\pi]$ で

$$(2.5) \quad 0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{\xi-1} < x_\xi = 2\pi$$

を除けば十分に滑らかであるとする. $f(x)$ の不連続点, $x_i : 0 \leq i \leq \xi - 1$ において

$$(2.6) \quad f(x_i) = \{f(x_i-) + f(x_i+)\}/2$$

であるとし, 不連続点における ν 次微係数の跳躍を π で割った値を,

$$(2.7) \quad \omega_\nu(f; x_i) = \{f^{(\nu)}(x_i-) - f^{(\nu)}(x_i+)\}/\pi$$

とする. $f(x)$ を十分に滑らかな周期関数とするために,

$$(2.8) \quad \frac{te^{xt}}{e^t - 1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} B_\nu(x) \frac{t^\nu}{\nu!} : |t| < 2\pi$$

で定義される Bernoulli 多項式, $B_\nu(x)$ を使って

$$(2.9) \quad p_\nu(x) = \frac{(2\pi)^\nu}{2 \cdot \nu!} B_\nu\left(\frac{x}{2\pi}\right)$$

なる ν 次の多項式を定義する. $p_\nu(x)$ は

$$(2.10) \quad \begin{cases} p_\nu^{(l)}(0+) = p_\nu^{(l)}(2\pi-) : l = 0, 1, \dots, \nu-2, \nu, \dots, \\ -p_\nu^{(\nu-1)}(0+) = p_\nu^{(\nu-1)}(2\pi-) = \pi/2, \\ p_1(0) = p_1(2\pi) = 0 \end{cases}$$

を満足する. $p_\nu(x) : x \in [0, 2\pi]$ を周期 2π で実軸上に周期的に延長して得られる区分的多項式を $\tilde{p}_\nu(x)$ とすると式 (2.10) から $\tilde{p}_\nu(x)$ は

$$(2.11) \quad \omega_{l-1}(\tilde{p}_\nu; 0) = \begin{cases} 1 : l = \nu, \\ 0 : l \neq \nu \end{cases}$$

なる性質を持つ. この区分的多項式を使って

$$(2.12) \quad P_m(x) = \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m \omega_{\nu-1}(f; x_i) \cdot \tilde{p}_{\nu}(x - x_i)$$

なる区分的多項式を定義すると, 式 (2.11) から

$$(2.13) \quad \omega_{l-1}(f; x_j) = \omega_{l-1}(P_m; x_j) : 1 \leq l \leq m; 0 \leq j \leq \xi - 1$$

となることが容易にわかる. すなわち, $P_m(x)$ は, $f(x)$ の不連続点で $m-1$ 次以下の導関数の跳躍が $f(x)$ のそれと一致するような区分的多項式である. 従って

$$(2.14) \quad \hat{f}_m(x) = f(x) - P_m(x) \in C^{m-1}(-\infty, \infty)$$

である. $f(x)$ の打ち切り Fourier 級数を

$$(2.15) \quad T_n(f; x) = \frac{1}{2}a_0(f) + \sum_{j=1}^{n-1} \{a_j(f) \cos jx + b_j(f) \sin jx\},$$

$$(2.16) \quad \begin{cases} a_j(f) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos jx dx, \\ b_j(f) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin jx dx, \end{cases}$$

と書くことにする. $\hat{f}_m(x)$ は $m-1$ 次以下の導関数が連続であるような周期関数であるから, その Fourier 係数 $a_j(\hat{f}_m), b_j(\hat{f}_m)$ は $O(j^{-m-1})$ で急速に減少する. 従って $\hat{f}_m(x)$ の Fourier 級数, $T_{\infty}(\hat{f}_m; x)$ は急速に収束する. 式 (2.14) からわかるように, $f(x)$ は

$$(2.17) \quad f(x) = T_{\infty}(\hat{f}_m; x) + P_m(x)$$

と展開される. これが Krylov の方法である. また $\xi = 1$ のときこれを $f(x)$ の Lanczos 表現という.

$\hat{f}_m(x)$ の Fourier 級数, $T_{\infty}(\hat{f}_m; x)$ を適当な項数で打ち切れば, 式 (2.17) の右辺は三角多項式と区分的多項式との和の形になる.

3. Lanczos 表現に基づく Lyness の補間法

本節では, 文献 [3] の Part II. Section 4. Organization of the Calculation に従って, Lanczos 表現に基づく一つの補間法を紹介する.

$\xi = 1$ のとき $f(x)$ を

$$(3.1) \quad \begin{aligned} F(x) = & \sum_{\nu=1}^m \Omega_{\nu-1}(f; 0) \cdot p_{\nu}(x) + \frac{1}{2} \bar{u}_0(\hat{F}_m) \\ & + \sum_{j=1}^{N/2-1} \{ \bar{u}_j(\hat{F}_m) \cos jx + \bar{v}_j(\hat{F}_m) \sin jx \} + \frac{1}{2} \bar{u}_{N/2}(\hat{F}_m) \cos \frac{N}{2} x \end{aligned}$$

を使って近似する。すなわち、予め設定した許容誤差 ϵ に対して

$$(3.2) \quad |f(x) - F(x)| < \epsilon$$

となるように $F(x)$ のパラメータを決める。Lyness は次のような手順を構成した。

Stage 1. 多項式の次数 m を決める。

Stage 2. $\omega_\nu(f; 0)$ の近似値, $\Omega_\nu(f; 0)$ を計算する。 m に応じて、たとえば 12 次程度までの微係数をすべて計算する。計算には前進差分、後退差分を使う。中心差分を使うことができれば、より正確な値を求めることができる。また、Cauchy の積分表現を使うこともできる。求める微係数の値はそれほど高精度である必要はなく、たとえば最高次の微係数は 10% あるいは 20% 程度の誤差を含んでいてもよい。

$$(3.3) \quad \hat{F}_m(x) = f(x) - \sum_{\nu=1}^m \Omega_{\nu-1}(f; 0) \cdot p_\nu(x)$$

が決まる。

Stage 3. N を決める。

Stage 4. $\bar{u}_j(\hat{F}_m) : 0 \leq j \leq N/2, \bar{v}_j(\hat{F}_m) : 1 \leq j \leq N/2 - 1$ を計算する。ここで

$$(3.4) \quad \bar{x}_r = \frac{2\pi r}{N} : 0 \leq r \leq N$$

として

$$(3.5) \quad \begin{cases} \bar{u}_j(f) = \frac{2}{N} \sum_{r=0}^{N-1} f(\bar{x}_r) \cos j \bar{x}_r, \\ \bar{v}_j(f) = \frac{2}{N} \sum_{r=0}^{N-1} f(\bar{x}_r) \sin j \bar{x}_r, \end{cases}$$

は $f(x)$ の離散 Fourier 係数である。この段階では高速 Fourier 変換を使うことができる。しかし、実際には m がそれほど大きくないので FFT の利用はあまり意味がない。

Stage 5. 誤差を評価する。誤差が ϵ 以下なら計算は完了である。誤差をどのように評価するかについては二通りの考えがある。

(i). 注意深く選択した x にたいして $f(x) - F(x)$ を計算する。

(ii). 理論的な誤差評価。Fourier 係数の漸近的な性質から打ち切り誤差を評価し、それに基づいて誤差を見積る。

Stage 6. 評価した誤差が ϵ 以上なら m を変えて Stage 2. へ、または N を変えて Stage 4. へ。

経験則であるが“性質のよい関数”に対しては、 $m = 8$ or $9, N = 32$ とすると誤差は $10^{-7} \cdot \|f\|_\infty$ 程度になる。

$f(x)$ の Lanczos 表現に基づいて Lyness が構成した補間法は以上の通りである。

4. Lanczos 表現, Krylov の方法は実用になるか?

前節までに, $f(x)$ の Lanczos 表現, Krylov の方法を紹介し, Lanczos 表現に基づく Lyness の補間法を紹介した. 十分に滑らかな周期関数に対する Fourier 級数が急速に収束することはよく知られており, その性質を利用するこれらの方法は一見して優れた計算法のように思われる. しかし, 実際にはこれから述べるように, これらの方法は, そのままでは数値的に不安定で実用性に乏しい.

さて, Krylov の方法では, まず式 (2.12) で与えられる区分的多項式 $P_m(x)$ を作り, それを $f(x)$ から引いて (式 (2.14)) 十分に滑らかな周期関数 $\hat{f}_m(x)$ を作る. $\hat{f}_m(x)$ の Fourier 級数は速く収束するので, 式 (2.17) のように $f(x)$ を展開して三角級数部を適当に打ち切る. これにより少ない項数で $f(x)$ を近似できる. この辺りの感覚は, 十分に滑らかな周期関数の Fourier 近似と同じであり感覚的に受け入れ易い方法であるといえる. 実際, 式 (2.17) における $P_m(x)$ の最大絶対値が $f(x)$ のそれを大幅に越えなければ Krylov の方法は優れた計算法である. しかし次に述べるように多くの場合, 式 (2.17) に於ける $P_m(x)$ の最大絶対値は $f(x)$ のそれを大幅に越えて, 式 (2.17) は激しい桁落ちを生ずる式になる.

まず, 式 (2.9) から $p_\nu(x)$ は

$$(4.1) \quad p_\nu(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^\nu} \text{cir}_\nu jx, \quad \text{cir}_\nu x = -\cos(x - \pi\nu/2)$$

と Fourier 展開される. この式から容易にわかるように $\|p_\nu\|_\infty \approx 1$ である. 一方, 式 (2.12) において ν が大きくなると $|\omega_{\nu-1}(f; x_i)|$ はきわめて大きくなることが多い. 従って $P_m(x)$ の各項の絶対値は $\|f\|_\infty$ に比較してきわめて大きくなる. このときには, 式 (2.17) の右辺は桁落ちの激しい式になり Krylov の方法は全体として実用性に乏しい方法になる. 当然ながらこれに基づいて構成された Lyness の補間法も同じように桁落ちの激しい計算法になる.

式 (2.17) における $P_m(x)$ の最大絶対値が極めて大きくなるなら, それと同じ程度に十分に滑らかな関数 $\hat{f}_m(x)$ の Fourier 級数, $T_\infty(\hat{f}_m; x)$ の最大絶対値も大きくなる筈である. しかし, このことは常識的には理解しにくい. そこでこのことについて簡単に述べることにする.

まず, 式 (2.16) で与えられる Fourier 係数に部分積分を反復適用すると,

$$(4.2) \quad a_j(f) = \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^{m+1} \omega_{\nu-1}(f; x_i) \frac{(-1)^\nu}{j^\nu} \text{cir}_\nu jx_i + \frac{(-1)^m}{\pi j^{m+1}} \int_0^{2\pi} f^{(m+1)}(t) \text{cir}_{m+1} jtdt$$

である. また, 式 (2.12), (4.1) から

$$(4.3) \quad a_j(P_m) = \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m \omega_{\nu-1}(f; x_i) \frac{(-1)^\nu}{j^\nu} \text{cir}_\nu jx_i$$

である. 従って,

$$(4.4) \quad \begin{aligned} a_j(\hat{f}_m) &= a_j(f) - a_j(P_m) \\ &= \sum_{i=0}^{\xi-1} \omega_m(f; x_i) \frac{(-1)^{m+1}}{j^{m+1}} \text{cir}_{m+1} jx_i + \frac{(-1)^m}{\pi j^{m+1}} \int_0^{2\pi} f^{(m+1)}(t) \text{cir}_{m+1} jtdt \end{aligned}$$

となる. 式 (4.4) からわかるように, $p_\nu(x)$ を使って十分に滑らかになった周期関数 $\hat{f}_m(x)$ の Fourier 係数はその絶対値が $O(j^{-m-1})$ で急速に減少する. しかし, $f(x)$ の高次導関数は大きくなることが多いので, 小さい j に対する係数, $a_j(\hat{f}_m)$ の絶対値はきわめて大きくなる傾向にある. 従って, $T_\infty(\hat{f}_m; x)$ の最大絶対値は極めて大きくなることもある. このときには式 (2.17) は桁落ちの激しい式になってしまう.

Krylov の方法や Lyness の補間法ではこの点についての解決がなされていない. このことが実用上の最大の欠点である. 次節ではこの欠点を解決して実用的な計算法を構成する.

5. Lanczos 表現, Krylov の方法の改良

$f(x)$ の Lanczos 表現, Krylov の方法における数値的不安定性を解決するためにまず次の関数列を定義する. すなわち,

$$(5.1) \quad \tilde{q}_\nu(x; k) = \tilde{p}_\nu(x) - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{1}{j^\nu} \text{cir}_\nu jx = \sum_{j=k}^{\infty} \frac{1}{j^\nu} \text{cir}_\nu jx$$

である. 容易にわかるように $\tilde{q}_\nu(x; k)$ は式 (2.10) と同じような性質をもつ.

$$(5.2) \quad \begin{cases} \tilde{q}_\nu^{(l)}(0+; k) = \tilde{q}_\nu^{(l)}(2\pi-; k) : l = 0, 1, \dots, \nu-2, \nu, \dots, \\ -\tilde{q}_\nu^{(\nu-1)}(0+; k) = \tilde{q}_\nu^{(\nu-1)}(2\pi-; k) = \pi/2, \\ \tilde{q}_1(0; k) = \tilde{q}_1(2\pi; k) = 0 \end{cases}$$

であるから $\tilde{p}_\nu(x)$ に対すると同じように

$$(5.3) \quad \omega_{l-1}(\tilde{q}_\nu; 0) = \begin{cases} 1 : l = \nu, \\ 0 : l \neq \nu \end{cases}$$

が成り立つ. また, その最大絶対値は

$$(5.4) \quad \begin{cases} \|\tilde{q}_1(x; k)\|_\infty = \pi/2, \\ \|\tilde{q}_\nu(x; k)\|_\infty \leq \zeta(\nu; k) \approx \frac{1}{(\nu-1)k^{\nu-1}} : \nu \geq 2 \end{cases}$$

でその上限が与えられる. 従って k を適当にとれば

$$(5.5) \quad R_m(x; k) = \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m \omega_{\nu-1}(f; x_i) \cdot \tilde{q}_\nu(x - x_i; k)$$

に $\|f\|_\infty$ を大幅に越える項は存在しない. さらに, 式 (2.13) と同じように

$$(5.6) \quad \omega_\nu(f; x_i) = \omega_\nu(R_m; x_i) : 0 \leq \nu \leq m-1; 0 \leq i \leq \xi-1$$

が満足される. よって

$$(5.7) \quad \tilde{f}_m(x) = f(x) - R_m(x; k) \in C^{m-1}(-\infty, \infty)$$

が成立つので

$$(5.8) \quad f(x) = T_{\infty}(\tilde{f}_m; x) + R_m(x; k)$$

は Krylov の方法と同じ収束性を持ち、しかも数値的に安定な展開式になる。従って、式 (5.8) の右辺を適当な項で打ち切った式は数値的に安定で、しかも高精度の近似式になる筈である。ここでは式 (5.8) を改良された Krylov の方法と呼ぶことにする。

次に $R_m(x; k)$ を使って十分に滑らかになった周期関数、 $\tilde{f}_m(x)$ の Fourier 係数の性質を吟味する。まず $\tilde{q}_{\nu}(x; k)$ と三角関数との間に成り立つ直交性

$$(5.9) \quad \int_0^{2\pi} \tilde{q}_{\nu}(x; k) \begin{cases} \cos jx \\ \sin jx \end{cases} dx = 0 : 0 \leq j \leq k-1$$

を使うと

$$(5.10) \quad \begin{cases} a_j(R_m) = 0 : j = 0, 1, \dots, k-1, \\ a_j(R_m) = \sum_{i=0}^{j-1} \sum_{\nu=1}^m \omega_{\nu-1}(f; x_i) \frac{(-1)^{\nu}}{j^{\nu}} \text{cir}_{\nu} jx_i \\ \quad = a_j(P_m) : j = k, k+1, \dots \end{cases}$$

を得ることができる。 $a_j(\tilde{f}_m) = a_j(f) - a_j(R_m)$ であるから

$$(5.11) \quad \begin{cases} a_j(\tilde{f}_m) = a_j(f) : j = 0, 1, \dots, k-1, (\approx \|f\|_{\infty}) \\ a_j(\tilde{f}_m) = a_j(f) - a_j(P_m) = a_j(\hat{f}_m) : j = k, k+1, \dots (\approx O(j^{-m-1})) \end{cases}$$

となる。 $b_j(\tilde{f}_m)$ についても同様である。このように $\tilde{f}_m(x)$ の Fourier 係数は、番号の若い係数は元の関数、 $f(x)$ のそれと同じである。従ってその絶対値は $f(x)$ の最大絶対値を大きくは越えない。一方、大きい番号の Fourier 係数はその絶対値が $O(j^{-m-1})$ で急速に零に収束する。このように改良された Krylov の方法は優れた性質を持っている。

実際の数値計算においては $\tilde{q}_{\nu}(x; k)$ の計算が難しい。式 (5.1) において $\|\tilde{p}_{\nu}\|_{\infty} \approx 1$ であるが $\|\tilde{q}_{\nu}(x; k)\|_{\infty}$ は $O(1/k^{\nu-1})$ であり、 k や ν が少し大きくなると、その絶対値はきわめて小さくなる。従って単純に多項式から三角多項式を引くだけでは大幅な桁落ちを生ずることになり全体として数値的に不安定な方法になってしまう。従って、実際の計算は

$$(5.12) \quad \tilde{q}_{\nu}(x; k) = \sum_{j=k}^{\infty} \frac{1}{j^{\nu}} \text{cir}_{\nu} jx$$

の形で行わなければならない。任意の x に対する $\tilde{q}_{\nu}(x; k)$ の計算は難しいので等間隔離散点上での値を計算することにする。すなわち、

$$(5.13) \quad \bar{x}_r = \frac{2\pi r}{N} : 0 \leq r \leq N$$

における値を計算する. 以下では $n = N/2$ とする. 三角関数の周期性と対称性を使うと

$$(5.14) \quad \begin{cases} \tilde{q}_{2i}(\bar{x}_r; k) = (-1)^{i-1} \left(\frac{1}{N}\right)^{2i} \left\{ \sum_{s=0}^{k-1(2)} \bar{\delta}_{2i}\left(\frac{s}{N}\right) \cos s\bar{x}_r + \sum_{s=k}^{N/2(3)} \bar{\tau}_{2i}\left(\frac{s}{N}\right) \cos s\bar{x}_r \right\}, \\ \tilde{q}_{2i+1}(\bar{x}_r; k) = (-1)^{i-1} \left(\frac{1}{N}\right)^{2i+1} \left\{ \sum_{s=0}^{k-1} \bar{\delta}_{2i+1}\left(\frac{s}{N}\right) \sin s\bar{x}_r + \sum_{s=k}^{N/2} \bar{\tau}_{2i+1}\left(\frac{s}{N}\right) \sin s\bar{x}_r \right\} \end{cases}$$

となる. ここで

$$(5.15) \quad \begin{cases} \bar{\delta}_i(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{(k+x)^i} + \frac{(-1)^i}{(k-x)^i} \right\}, \\ \bar{\tau}_i(x) = \frac{1}{x^i} + \bar{\delta}_i(x) \quad : 0 \leq x \leq \frac{1}{2} \end{cases}$$

である. 式 (5.14) は $\bar{\delta}_\nu(s/N) : 0 \leq s \leq k-1$, $\bar{\tau}_\nu(s/N) : k \leq s \leq N/2$ の定数倍を係数とする三角多項式の等間隔離散点上における値である. 従って, FFT により効率的に計算できる. 尚, ここでは述べないが式 (5.15) で与えられる $\bar{\delta}_\nu(x), \bar{\tau}_\nu(x)$ は十分に実用的な計算量で計算できる [7].

式 (5.8) 右辺の三角級数部を有限項で打ち切り, $f(x)$ の近似式とする. すなわち,

$$(5.16) \quad \begin{aligned} H\{^m_n\}(f; x) &= T_n(\tilde{f}_m; x) + R_m(x; k) \\ &= \frac{1}{2}a_0(f) + \sum_{j=1}^{k-1} \{a_j(f) \cos jx + b_j(f) \sin jx\} + \sum_{j=k}^{n-1} \{a_j(\tilde{f}_m) \cos jx + b_j(\tilde{f}_m) \sin jx\} \\ &\quad + \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m \omega_{\nu-1}(f; x_i) \cdot \tilde{q}_\nu(x - x_i; k) \end{aligned}$$

である. 上式は複雑な形に見えるが整理すると区分的多項式と三角多項式との和の形になっている. この意味で $H\{^m_n\}(f; x)$ を $f(x)$ に対する複合多項式近似と呼ぶ.

6. 改良された Krylov の方法の補間への応用

$f(x)$ に関して $\bar{x}_r = 2\pi r/N : 0 \leq r \leq N-1$ において $f(\bar{x}_r)$ が与えられ, 不連続点 $x_i : 0 \leq i \leq \xi-1$ において, $\omega_\nu(f; x_i) : 0 \leq \nu \leq m-1$ が与えられたとき, $n = N/2$ として

$$(6.1) \quad \begin{aligned} h(x) &= \frac{1}{2}\bar{a}_0 + \sum_{j=1}^{k-1} (\bar{a}_j \cos jx + \bar{b}_j \sin jx) + \sum_{j=k}^{n-1} (\check{a}_j \cos jx + \check{b}_j \sin jx) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m c_{i,\nu} \cdot \tilde{q}_\nu(x - x_i; k) \end{aligned}$$

の形の式で

$$(6.2) \quad \begin{cases} h(\bar{x}_r) = f(\bar{x}_r) : 0 \leq r \leq N-1, \\ \omega_\nu(h; x_i) = \omega_\nu(f; x_i) : 0 \leq i \leq \xi-1; 0 \leq \nu \leq m-1 \end{cases}$$

を満たすようにその係数をきめる。まず,

$$(6.3) \quad c_{i,\nu} = \omega_{\nu-1}(h; x_i) = \omega_{\nu-1}(f; x_i) : 0 \leq i \leq \xi-1; 1 \leq \nu \leq m$$

が直ちに求まる。次に, $f(x)$ の不連続点 x_i に関して

$$(6.4) \quad \frac{Nx_i}{2\pi} = r_i : 0 \leq i \leq \xi-1$$

はすべて整数であるとする。このとき, 式 (5.14) などを使うと

$$(6.5) \quad h(\bar{x}_r) = \frac{1}{2}\bar{u}_0 + \sum_{j=1}^{n-1} (\bar{u}_j \cos j\bar{x}_r + \bar{v}_j \sin j\bar{x}_r) + \frac{1}{2}\bar{u}_n \cos n\bar{x}_r, \quad 0 \leq r \leq N-1,$$

$$(6.6) \quad \begin{cases} \bar{u}_j = \frac{2}{N} \sum_{r=0}^{N-1} h(\bar{x}_r) \cos j\bar{x}_r : 0 \leq j \leq n, \\ \bar{v}_j = \frac{2}{N} \sum_{r=0}^{N-1} h(\bar{x}_r) \sin j\bar{x}_r : 1 \leq j \leq n-1, \end{cases}$$

$$(6.7) \quad \begin{cases} \bar{u}_j = \bar{a}_j + \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m c_{i,\nu} \left(-\frac{1}{N}\right)^\nu \bar{\delta}_\nu \left(\frac{j}{N}\right) \text{cir}_\nu j x_i : 0 \leq j \leq k-1, \\ \bar{v}_j = \bar{b}_j - \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m c_{i,\nu} \left(-\frac{1}{N}\right)^\nu \bar{\delta}_\nu \left(\frac{j}{N}\right) \text{cir}_{\nu-1} j x_i : 1 \leq j \leq k-1, \end{cases}$$

$$(6.8) \quad \begin{cases} \bar{u}_j = \check{a}_j + \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m c_{i,\nu} \left(-\frac{1}{N}\right)^\nu \bar{\tau}_\nu \left(\frac{j}{N}\right) \text{cir}_\nu j x_i : k \leq j \leq n, \\ \bar{v}_j = \check{b}_j - \sum_{i=0}^{\xi-1} \sum_{\nu=1}^m c_{i,\nu} \left(-\frac{1}{N}\right)^\nu \bar{\tau}_\nu \left(\frac{j}{N}\right) \text{cir}_{\nu-1} j x_i : k \leq j \leq n-1, \end{cases}$$

なる関係式が得られる。

$h(\bar{x}_r) = f(\bar{x}_r) : 0 \leq r \leq N-1$ を式 (6.6) に適用して, 実 FFT を使い $f(x)$ の離散 Fourier 係数 \bar{u}_j, \bar{v}_j を得る。次に式 (6.7) から \bar{a}_j, \bar{b}_j を得て, 式 (6.8) から \check{a}_j, \check{b}_j を得る。

以上の計算中に $f(x)$ の最大絶対値を大幅に越えるような, 絶対値の大きい数は現れない。また必要なすべての係数を求めるのに掛かる時間は実 FFT の計算に要する時間の数倍程度である。

ここでは詳しくは述べないが, 以上のようにして得た係数などについて, まず

$$(6.9) \quad |\bar{a}_j - a_j(f)|, |\bar{b}_j - b_j(f)| \propto O(N^{-m-1})$$

である。すなわち, FFT を使って得られた離散 Fourier 係数, \bar{u}_j, \bar{v}_j を, 式 (6.7) により補正すると高精度の Fourier 係数を求めることができる。また, 式 (6.8) により離散 Fourier 係数を修正すると,

$$(6.10) \quad |\check{a}_j|, |\check{b}_j| \propto O(j^{-m-1})$$

のように, 急速にその絶対値が零に収束する系列を得ることができる。この性質は, たとえば種々のデータ圧縮などに利用し得ると思われる。最後に,

$$(6.11) \quad |f(x) - h(x)| \propto O(n^{-m})$$

である。すなわち, 式 (6.5) により高精度の補間値を得ることができる。

これらの計算において, 不連続点における高次微係数の値を必要とするが, 数値微分を使って $\omega_\nu(f; x_i)$ を近似することができる。このようにしても誤差は, 式 (6.9), (6.10), (6.11) と同じ収束率になる。

7. おわりに

Cooley & Tukey[8] が高速 Fourier 変換の算法を公表して 20 数年が経過している。FFT を使うと, すべての離散 Fourier 係数を少ない計算時間で計算できる。また, 丸め誤差も非常に小さいことが知られている。この意味で十分に滑らかな周期関数をサンプリングして得られたデータに対しては, FFT は打ち切り誤差の小さい Fourier 係数を高速に与える優れた算法である。一方, 非周期性の関数, あるいは不連続点を持つ周期関数をサンプリングして得られたデータに対しては, 従来, FFT はそれほど有用な計算法ではなかったと思われる。計算時間は少ないが, 誤差の大きい結果を与える計算法だからである。これは FFT 算法の責任ではなく, 離散 Fourier 係数の誤差が大きいために生ずる欠点であるが, それがそのまま FFT 法の欠点になっていたのである。本稿で述べた複合多項式による補間は FFT 法の欠点を補う計算法である。本稿の方法を FFT と組み合わせれば, 高速に高精度の Fourier 係数を与える, 非常に有用な計算法になる。今後, 調和解析, 調和合成などの分野で有用性を発揮すると思われる。

参考文献

- [1] Lanczos : Discourse on Fourier Series, p.255, Oliver & Boyd, Edinburgh and London(1966).
- [2] Jones, W.B. and Hardy, G. : Accelerating Convergence of Trigonometric Approximations, Math. Comp., Vol.24, No.111, pp.547-560(1970).
- [3] Lyness, J.N. : Computational Techniques Based on the Lanczos Representation, Math. Comp., Vol.28, No.125, pp.81-123(1974).
- [4] Kantorovich, L.V. and Krylov, V.I. : Approximate Methods of Higher Analysis, p681, Interscience Publishers, Inc., New York(1964).
- [5] Cai, W. , Gottlieb, D. and Shu, C.W. : Essentially Nonoscillatory Spectral Fourier Methods for Shock Wave Calculations, Math. Comp., Vol.52, No.186, pp.389-410(1989).
- [6] de Meyer, H. , Vanthournout, J. and Berghe, G.V. : On a New Type of Mixed Interpolation, J. Comp. Appl. Math., Vol.30, pp.55-69(1990).
- [7] 秦野和郎 : 離散化関数の計算法, 情報処理学会論文誌, Vol.31, No.7, pp.943-951, (1990)
- [8] Cooley, J.W. and Tukey, J.W. : An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series, Math. Comp., Vol.19, pp.297-301(1965).